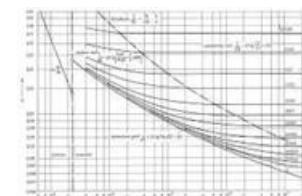
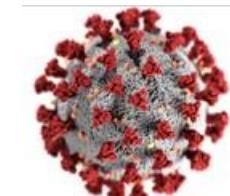
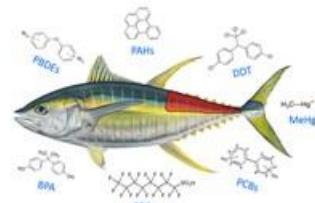
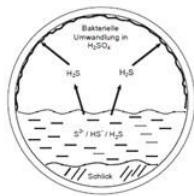
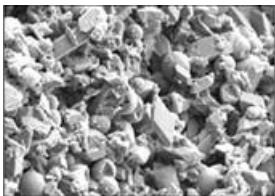


Bachelor Infrastruktur

Vorlesung und Übung: Naturwissenschaftliche Grundlagen

2.3.1 chemische Reaktionen: Massenwirkungsgesetz, Enthalpie

Prof. Dr. Welker, Frankfurt University of Applied Sciences



Naturwissenschaftliche Grundlagen

Chemie

Nr. 2.3.1 chemische Reaktionen

- **Grundlagen chemische Reaktionen**
 - chemische Gleichgewichte
 - Massenwirkungsgesetz
 - Berechnung von Reaktionsenthalpien

Chemische Grundlagen

Reaktionen

Unterscheidung zu **physikalischen Vorgängen**:

- Aggregatzustandswechsel (z.B. Eis → flüssiges Wasser)
- Mischen (z.B. Kuchenteig)
- Lösen von Stoffen (z.B. Salz in Wasser)

Hier bleiben die **chemischen Zusammensetzungen** gleich.

Bei **chemischen Reaktionen** werden **Ausgangsstoffe (Edukte)** in **Endstoffe (Produkte)** umgewandelt.

Die **chemische Zusammensetzung ändert** sich.

- Backen Kuchenteig (CO_2 Entstehung aus NaHCO_3 und nichtenzymatische Bräunung aus Reaktion Proteine und Kohlenhydrate)

Chemische Grundlagen

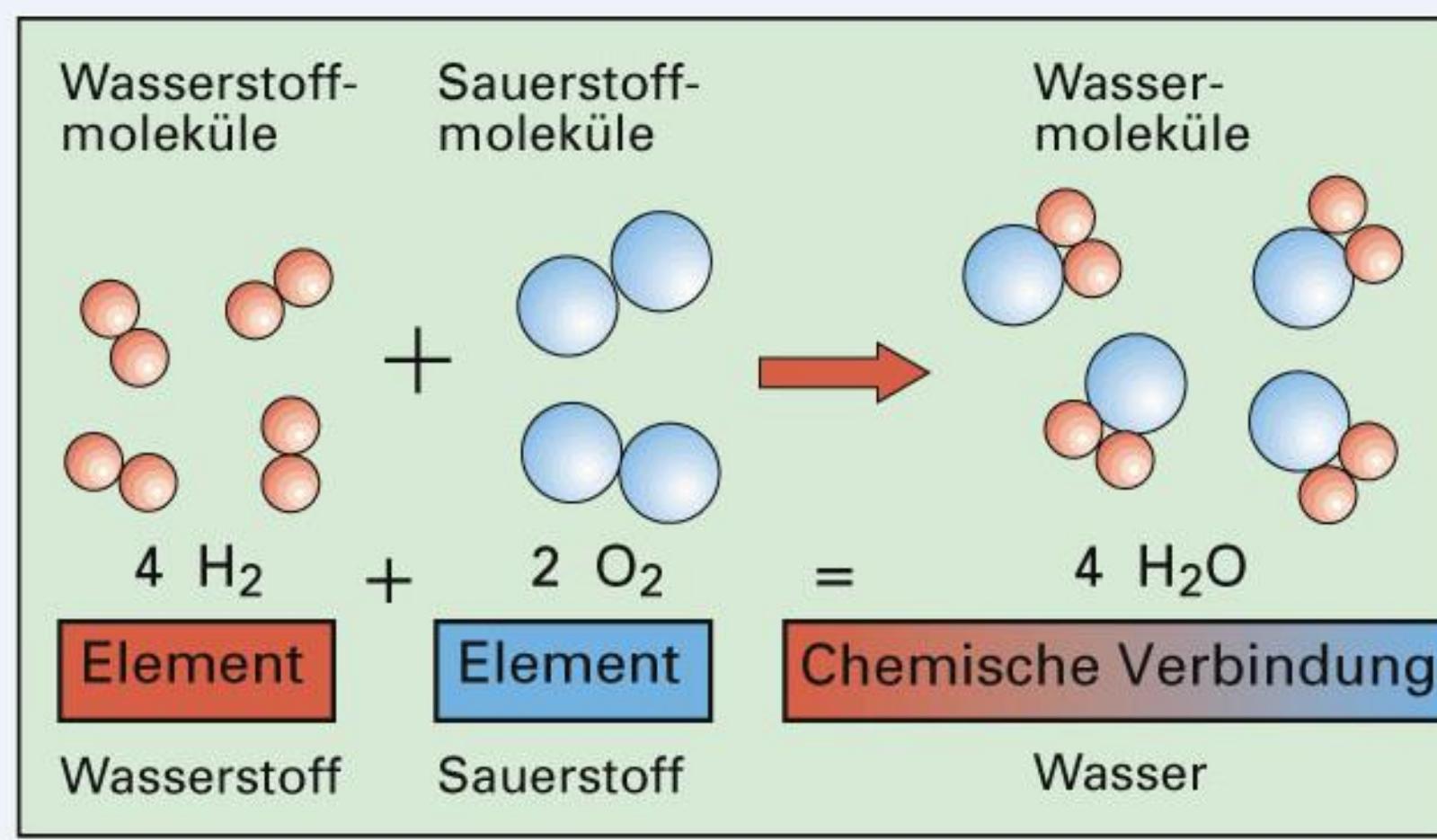
Reaktionen

Wichtige Kenngrößen:

- **Mengenverhältnissen** zwischen Edukten und Produkten
- **Energiebilanz**
- **Geschwindigkeit der Reaktion**

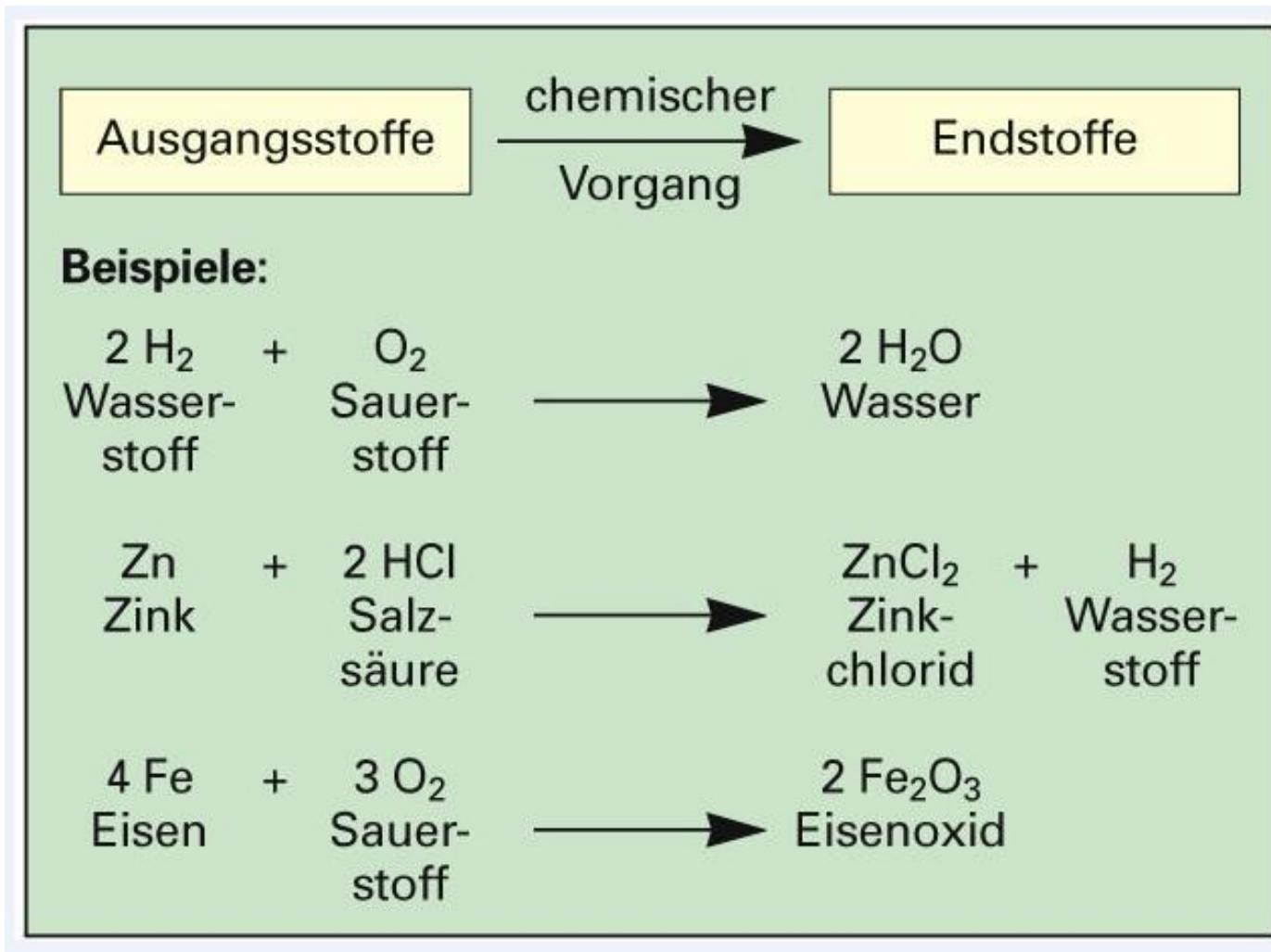
Chemische Grundlagen

Reaktionen



Chemische Grundlagen

Reaktionen



Chemische Grundlagen

Reaktionen

- Im allgemeinen laufen chemische Reaktionen nicht einfach in eine Richtung ab.
- Sobald Produkte vorhanden sind, setzt die Rückreaktion ein → **Endstoffe (Produkte)** werden wieder **Ausgangsstoffe (Edukte)**



- Wenn die Hinreaktion und die Rückreaktion gleich schnell sind, befindet sich das System im **Gleichgewicht**.
- Bei konstantem **Druck** und **Temperatur** und **konstanten Konzentrationen der Reaktionspartner** gilt das **Massenwirkungsgesetz**.

Chemische Grundlagen

Reaktionen

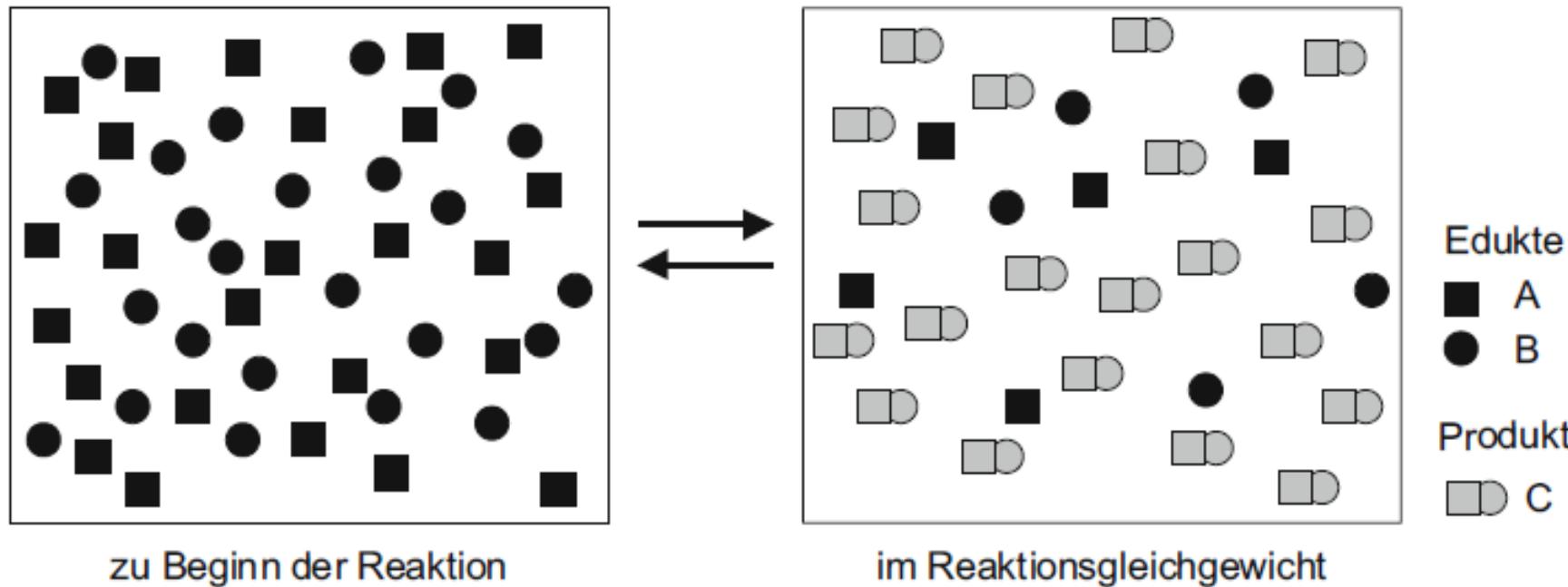


Abb. 10.1 Moleküle bei einer chemischen Gleichgewichtsreaktion

Chemische Grundlagen

Reaktionen

Massenwirkungsgesetz



$$K_c = \frac{k_H}{k_R} = \frac{c^\gamma(C) \cdot c^\delta(D)}{c^\alpha(A) \cdot c^\beta(B)}$$

K_c : **Gleichgewichtskonstante** (bei konstantem Druck und Temperatur)

k_H: Gleichgewichtskonstante Hinreaktion

k_R: Gleichgewichtskonstante Rückreaktion

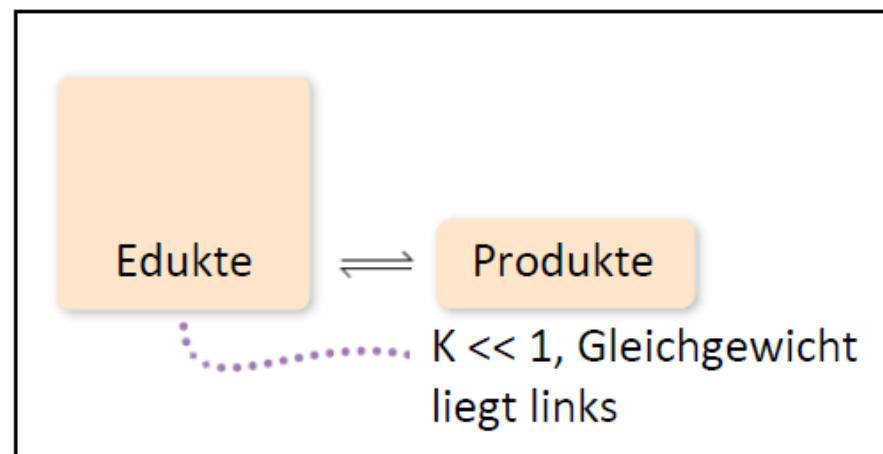
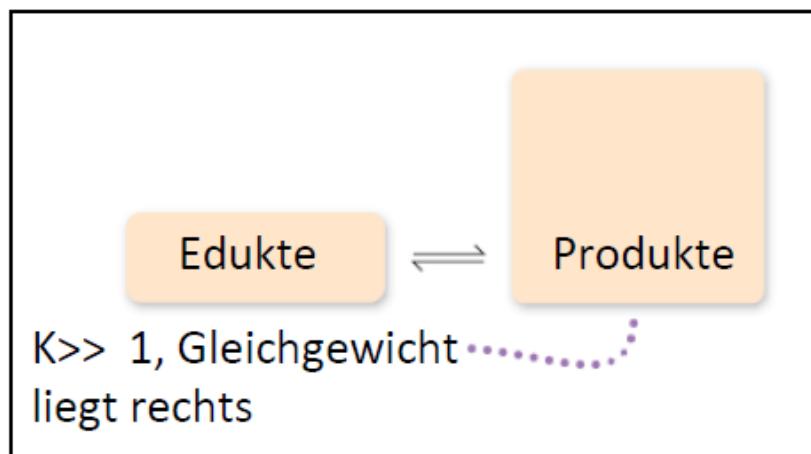
c: concentration, oft als eckige Klammer angezeigt [...], Gase: Partialdrücke

α, β, γ und δ sind die jeweiligen stöchiometrischen Koeffizienten

Chemische Grundlagen

Reaktionen

Massenwirkungsgesetz



Voraussage über die **Richtung der Reaktion:**

$K = 1$: **Gleichgewichtszustand**

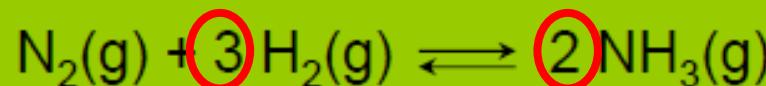
$K > 1$: **Produktseite** überwiegt

$K < 1$: **Ausgangsstoffe (Edukte)** überwiegen

Chemische Grundlagen

Reaktionen, Beispiele MWG

Reaktion:



Massenwirkungsgesetz:

$$K = \frac{[NH_3]^2}{[N_2] \times [H_2]^3}$$

Reaktion:



Massenwirkungsgesetz:

$$K = \frac{[CO]^2}{[CO_2]}$$

Ist ein Feststoff (hier C(s)) an einer Reaktion beteiligt, dann wird seine Konzentration auf 1 gesetzt. Der Grund dafür liegt darin, dass diese Feststoffe meist im Überschuss vorliegen.

Chemische Grundlagen

Reaktionen

- **Prinzip des kleinsten Zwangs (Le-Chatelier-Prinzip)**
- Übt man auf ein im Gleichgewicht befindliches System einen **Zwang aus, (Veränderung Temperatur, Druck oder Konzentrationen)**, so reagiert das System derart, dass es dem Zwang ausweicht oder nachgibt bzw. dass der Zwang vermindert oder abgeschwächt wird.

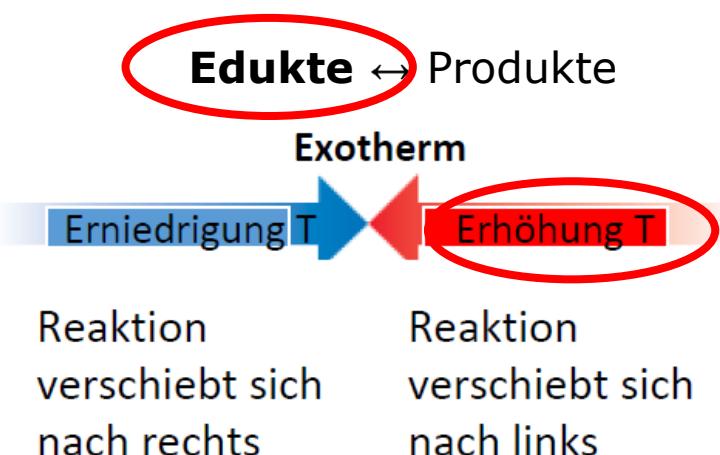
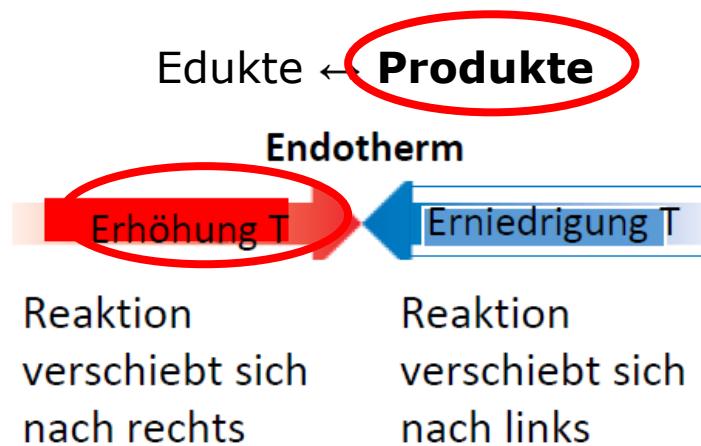
Chemische Grundlagen

Reaktionen

Veränderung Temperatur

Durch **Erhöhung** der Temperatur wird das Gleichgewicht

- bei **endothermen Reaktionen** (Gefäß wird kalt) zu den **Produkten** (nach rechts)
- bei **exothermen Reaktionen** (Gefäß wird warm) zu den **Edukten** verschoben (nach links)



Chemische Grundlagen

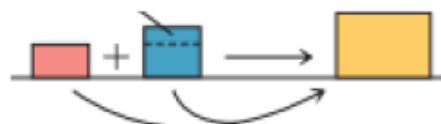
Reaktionen

Veränderung der **Konzentration** der Reaktionspartner

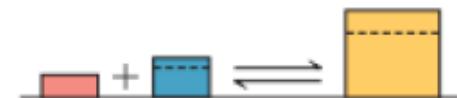
Ausgangs-
Gleichgewicht



Stoff
hinzugefügt



Gleichgewicht
wiederhergestellt



Einfluss der Konzentration

Durch Entfernung der Produkte oder durch
Zufuhr von Edukten wird das Gleichgewicht zu
den Produkten verschoben.

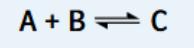
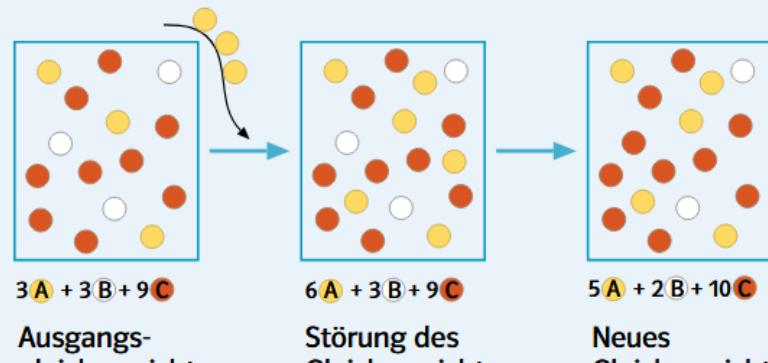
$$K = \frac{[C]^c \times [D]^d}{[A]^a \times [B]^b}$$

Chemische Grundlagen

Reaktionen

Veränderung der **Konzentration** der Reaktionspartner

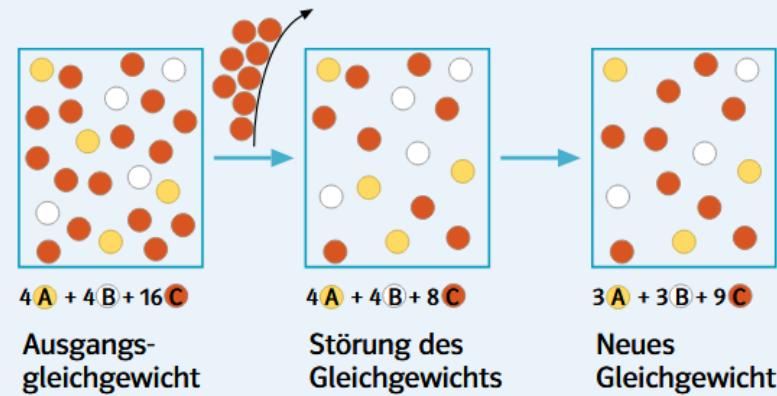
Zufuhr Edukt



$$K_c = \frac{c(\text{C})}{c(\text{A}) \cdot c(\text{B})}$$

$$K_c = 1\text{l/mol}$$

Entnahme Produkt



Zufuhr eines Reaktionspartners (hier: **A**) verschiebt das Gleichgewicht in die Richtung, die einen Teil dieser Komponente verbraucht.

Wegnahme eines Reaktionspartners (hier: **C**) verschiebt das Gleichgewicht in die Richtung, die einen Teil dieser Komponente entstehen lässt.

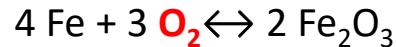
B2 Beeinflussung eines chemischen Gleichgewichts durch Stoffmengen- und Konzentrationsänderung

Chemische Grundlagen

Reaktionen

Veränderung der **Konzentration** der Reaktionspartner

- Beispiel: **Zufuhr Edukt (hier Sauerstoff O_2)** → schnellere Bildung des **Produktes Fe_2O_3**



Stahlwolle wird erhitzt

in Luft ist **weniger O_2**

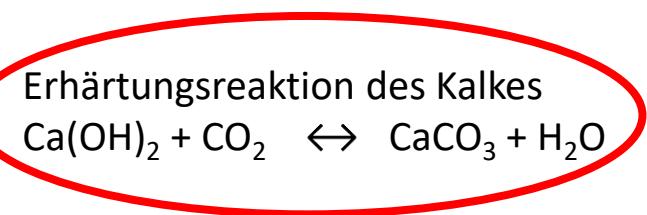
<- Luft
reiner O_2 ->



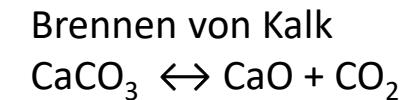
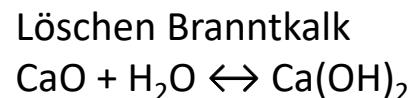
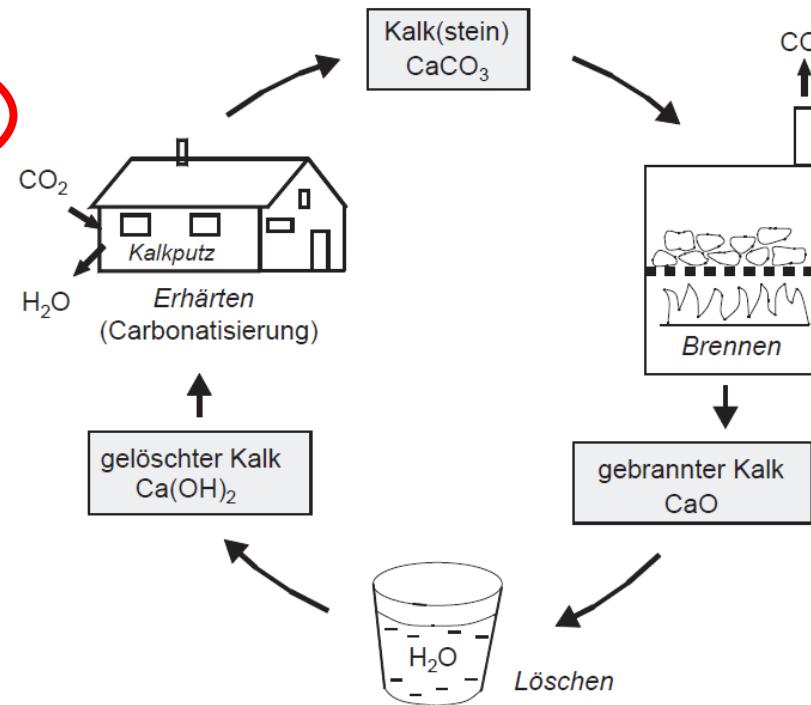
Erhitzte Stahlwolle,
heftige Bildung von Fe_2O_3

Chemische Grundlagen

Reaktionen, „Kalkkreislauf“



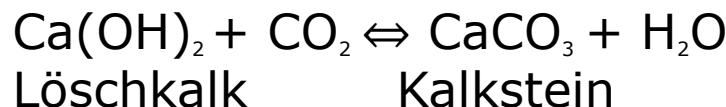
Da Konzentration CO_2 (Edukt) erhöht wird, läuft die Reaktion zu Gunsten von CaCO_3 (Produkt) ab



Da CO_2 (Produkt) entfernt wird, läuft die Reaktion zu Gunsten von CaO (Produkt) ab

Chemische Grundlagen

Reaktionen, „Kalkkreislauf“



erwünschte schnelle Bildung
des Produktes CaCO_3 Kalkstein

Gleichgewicht

$$\frac{[CaCO_3]^1 \cdot [H_2O]^1}{[Ca(OH)_2]^1 \cdot [CO_2]^1} = K$$

Ausbeute

$$[CaCO_3] = K \cdot \frac{[Ca(OH)_2] \cdot [CO_2]}{[H_2O]}$$

Bei gegebener $\text{Ca}(\text{OH})_2$ -Konzentration kann eine **größere Ausbeute an CaCO_3** erreicht werden durch

Veränderung Konzentration: Zufuhr CO₂-Konzentration (Edukt) und/oder Entnahme von H₂O (Produkt) → früher: Einsatz Koksöfen oder Propangasbrenner

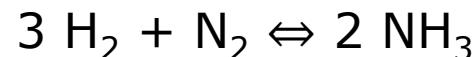
Chemische Grundlagen

Reaktionen

Veränderung Druck

Haber-Bosch Verfahren (Nobelpreis 1918):

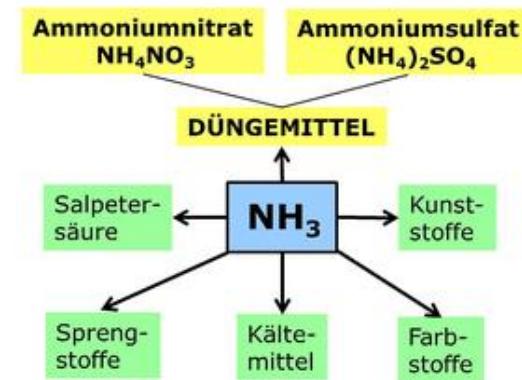
Produktion von **Ammoniak NH_3** (Ausgangsstoff für Salpetersäure, Pflanzenschutzmittel, Düngemittel, Farbstoffe sowie Kunstfasern...) aus **Wasserstoff H_2 und Stickstoff N_2**



4 mol Gas Wasserstoff u. Stickstoff \rightleftharpoons 2 mol Gas Ammoniak

→ Erhöhung **Temperatur** (ca. 400–500 °C)

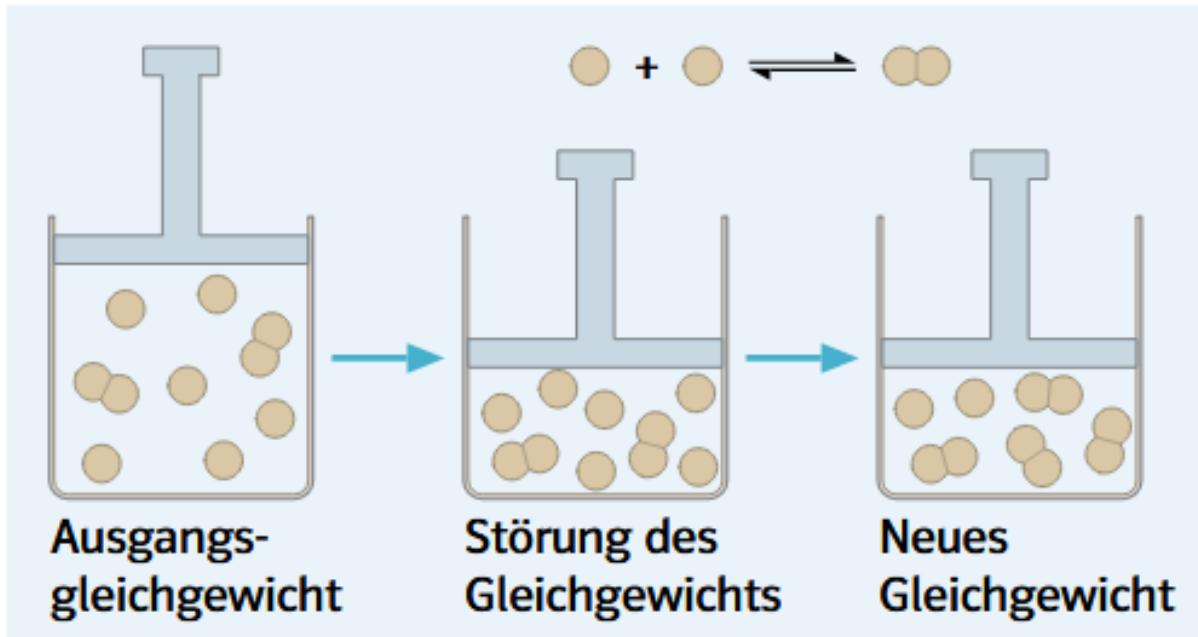
Aber: durch Prinzip des kleinsten Zwanges wird bei **exothermen Reaktionen** das Gleichgewicht zu den **Edukten** verschoben



Chemische Grundlagen

Reaktionen

Veränderung Druck



Eine Erhöhung des **Druckes** verschiebt ein Gleichgewicht, an dem gasförmige Stoffe beteiligt sind, **zu der Seite mit der kleineren Anzahl von Gasteilchen.**

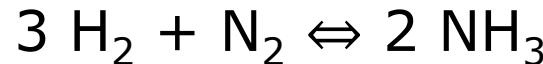
B6 Beeinflussung des chemischen Gleichgewichts einer Gasreaktion durch Druckerhöhung

Chemische Grundlagen

Reaktionen

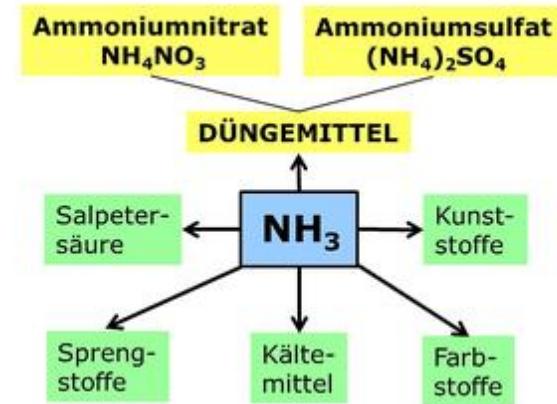
Veränderung Druck

Haber-Bosch Verfahren



Erhöhung Druck (> 200 bar)

- Verschiebung Gleichgewicht bei Gasreaktionen stets nach der Seite, auf der die **geringere Anzahl von Molekülen** (hier Ammoniak) steht.
- Das System verringert den durch eine Volumenverkleinerung erzeugten Druck, indem es zugunsten der Seite abläuft, die die geringere Teilchenzahl aufweist und somit das kleinere Volumen benötigt.

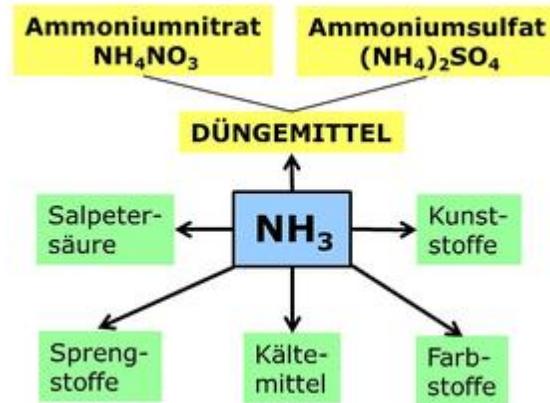
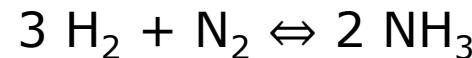


Chemische Grundlagen

Reaktionen

Einsatz Katalysatoren

Haber-Bosch Verfahren (Nobelpreis 1918):



→ Geschwindigkeit durch **Katalysator Eisen** (Magnetit: FeO und Fe₂O₃) schneller

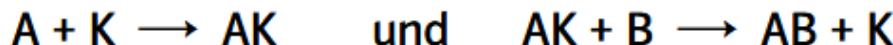
Chemische Grundlagen

Reaktionen

Katalysatoren

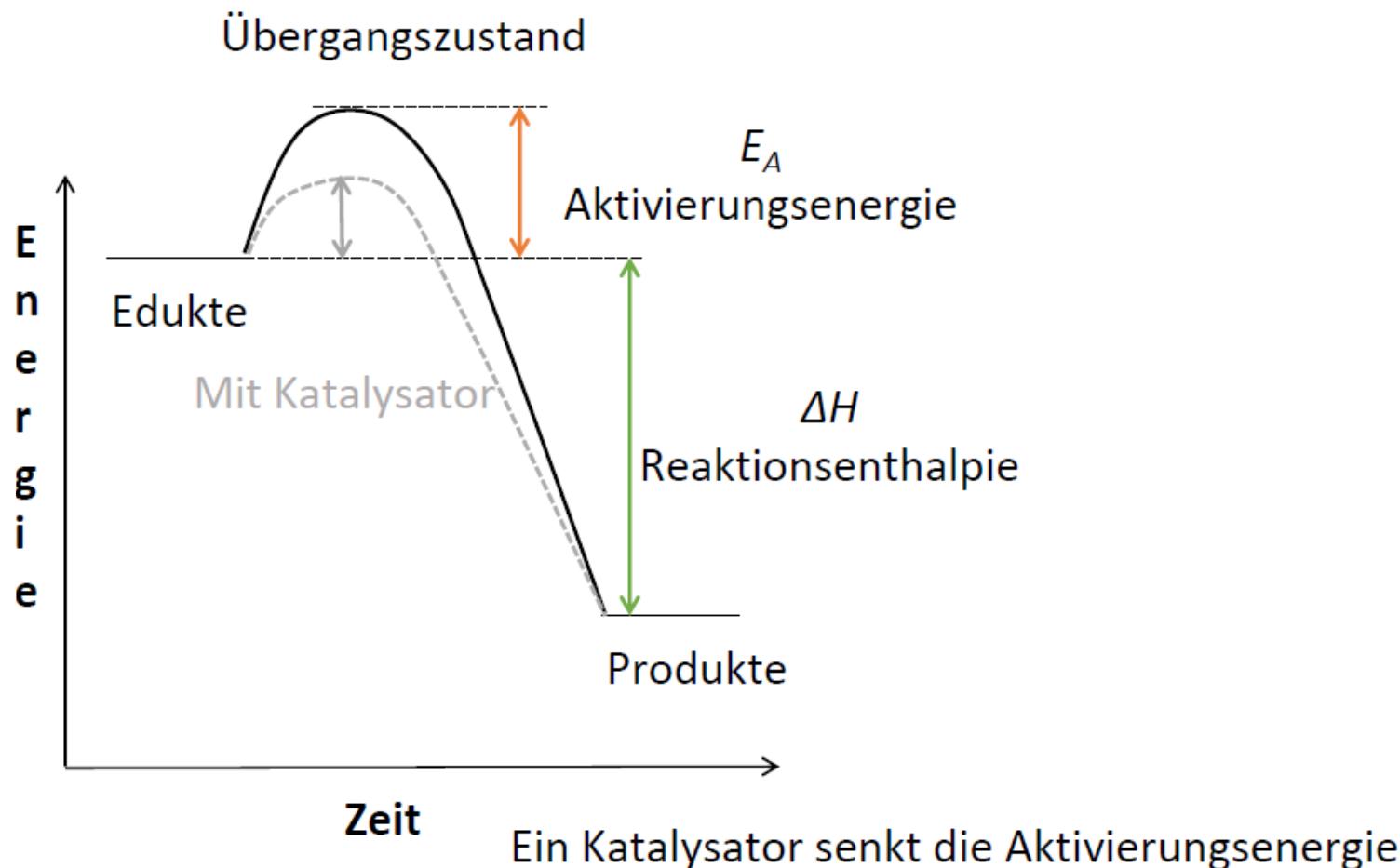
- Wilhelm Ostwald (1853–1932, Nobelpreis 1909): „Ein Katalysator ist jeder Stoff, der, ohne im Endprodukt einer chemischen Reaktion zu erscheinen, ihre Geschwindigkeit verändert.“
- **Katalysatoren** bilden mit einem **Edukt ein Zwischenprodukt**, das leichter weiter reagiert als der unveränderte Ausgangsstoff.
- sie beschleunigen die Reaktion, in dem sie die **Aktivierungsenergie** herabsetzen.
- Katalysatoren bleiben durch den Vorgang unverändert!

Die Reaktion $A + B \rightarrow AB$ kann z.B. mit einem Katalysator K über zwei Stufen laufen:



Chemische Grundlagen

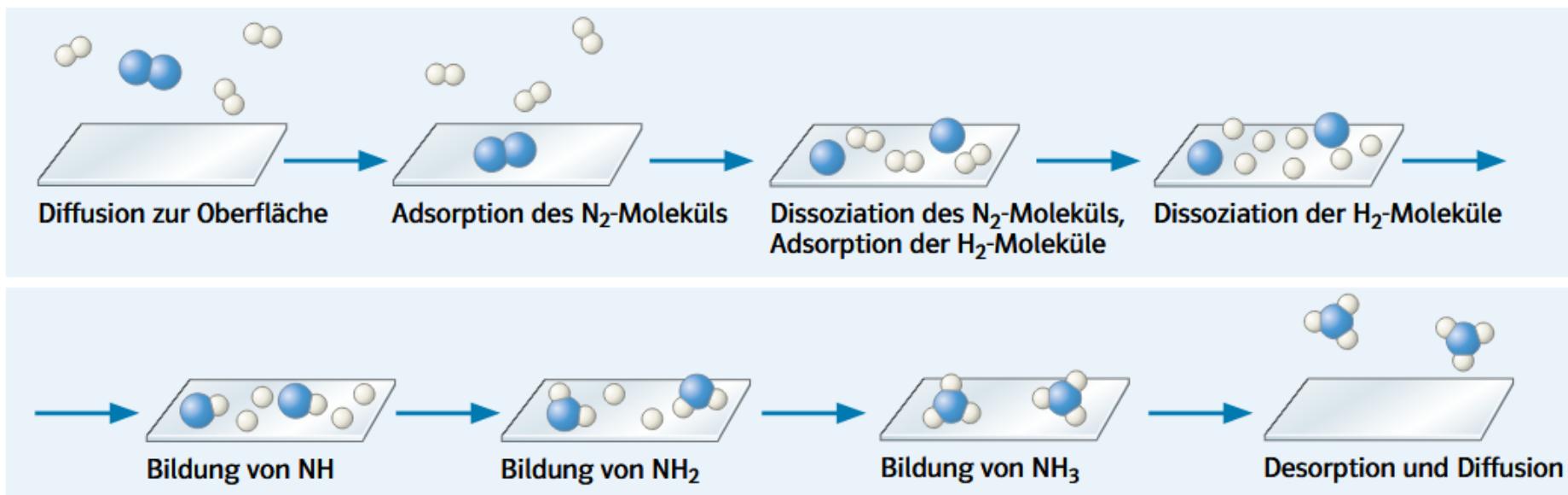
Reaktionen



Chemische Grundlagen

Reaktionen

Einsatz Katalysatoren im Haber-Bosch Verfahren



B4 Synthese von Ammoniak an einer Katalysatoroberfläche (heterogene Katalyse) nach der Reaktionsgleichung $3 \text{ H}_2(\text{g}) + \text{N}_2(\text{g}) \rightarrow 2 \text{ NH}_3(\text{g})$

Chemische Grundlagen

Reaktionen

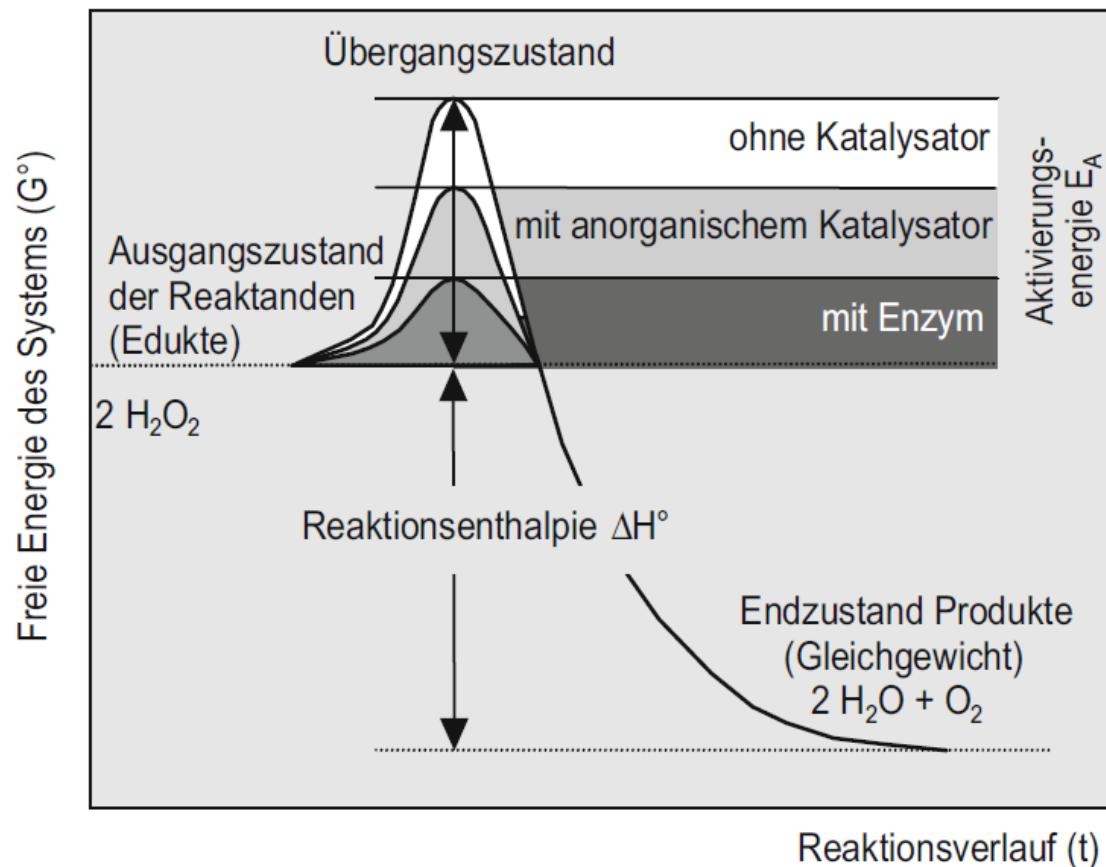
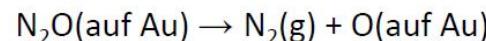
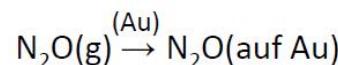
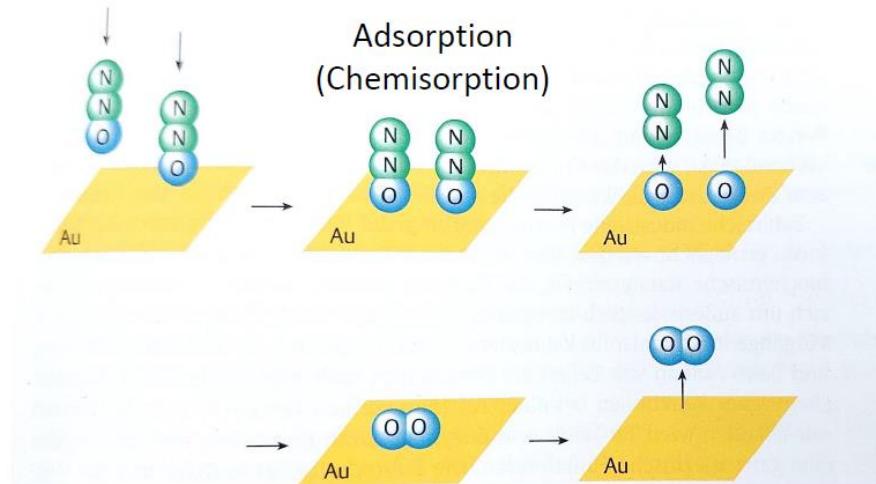


Abb. 16.1 Reaktionsablauf nach Arrhenius: Energieprofil der Zerlegungsreaktion einer metastabilen Verbindung am Beispiel von Wasserstoffperoxid

Chemische Grundlagen

Reaktionen

- **Heterogene Katalyse: Lachgas (N_2O , ca. 300 mal klimaschädlicher als CO_2 , oft in Produktionsprozessen Abgaskomponente, Landwirtschaft)**
- Reaktion von **Lachgas (N_2O)** zu **Stickstoff (N_2)** und **Sauerstoff (O_2)** mit **Goldfolie (Katalysator)**



Chemische Grundlagen

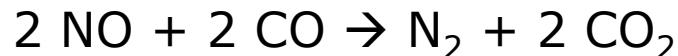
Reaktionen

Heterogene Katalyse: Autokatalysator

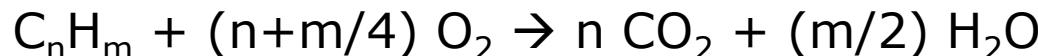
Keramik mit sehr großer Oberfläche aus **Al₂O₃** und **Palladium, Rhodium** (500 °C nach ca. 5 min)



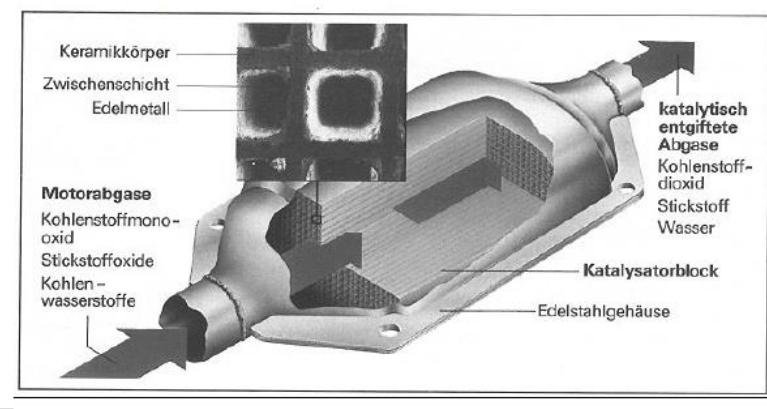
Kohlenmonoxid (Gift)



Stickstoffmonoxid, Luftschadstoff Bildung NO₂



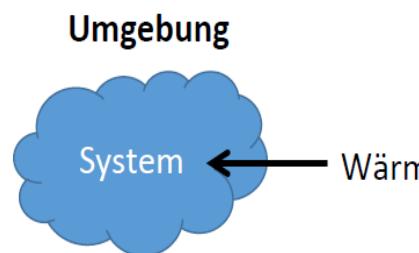
unverbrannte Kohlenwasserstoffe (Benzol), gesundheitsschädlich



Chemische Grundlagen

Reaktionen, Reaktionsenthalpie

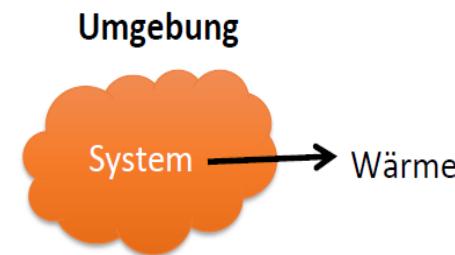
- **Reaktionsenthalpie ΔH_R** : Reaktionswärme (Energie), die von einer bei konstantem Druck ablaufenden chemischen Reaktion abgegeben oder aufgenommen wird.



$$\Delta H > 0$$

endotherm

Lösen NaCl in Wasser



$$\Delta H < 0$$

exotherm

Verbrennungsreaktionen

Chemische Grundlagen

Reaktionen, Reaktionsenthalpie

- **Reaktionsenthalpie** ΔH_R : Reaktionswärme (Energie), die von einer bei konstantem Druck ablaufenden chemischen Reaktion abgegeben oder aufgenommen wird.
- **Reaktionsenthalpie** kann zum einen **experimentell** in einem Kalorimeter bestimmt werden.

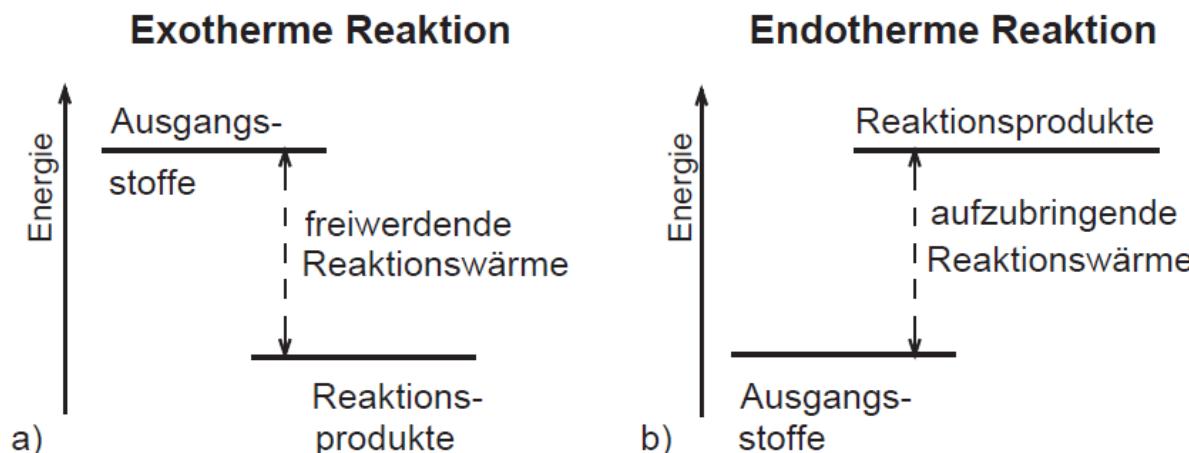


Abbildung 4.1 Schematische Energiediagramme a) exotherme Reaktion, b) endotherme Reaktion

Chemische Grundlagen

Reaktionen, Reaktionsenthalpie

- **Berechnung von ΔH_R Reaktionsenthalpie aus ΔH_B Bildungsenthalpie** der Reaktionspartner
- **ΔH_B Bildungsenthalpie** (entspricht auch ΔH_f "formation"):
Reaktionsenthalpie für die Bildung von 1 mol einer Verbindung aus ihren **Elementen** bei Standardbedingungen (Temperatur und Druck).
- **ΔH_B Bildungsenthalpie** von **Elementen** (z.B. O_2) ist **null**.
- Je negativer **ΔH_B** ist, umso stabiler (d.h. "reaktionsunwilliger") ist der Stoff.
- Je positiver **ΔH_B** ist, umso instabiler (d.h. "reaktionsbereiter") ist der Stoff.

Chemische Grundlagen

Reaktionsenthalpie

Die Reaktionsenthalpie einer beliebigen Reaktion (unter Standardbedingungen) ergibt sich aus der Differenz der Summe der Standardbildungsenthalpien der Reaktionsprodukte und der Summe der Standardbildungsenthalpien der Edukte.

$$\Delta H_R^\circ = \sum \Delta H_B^\circ \text{ (Reaktionsprodukte)} - \sum \Delta H_B^\circ \text{ (Ausgangsstoffe)}$$

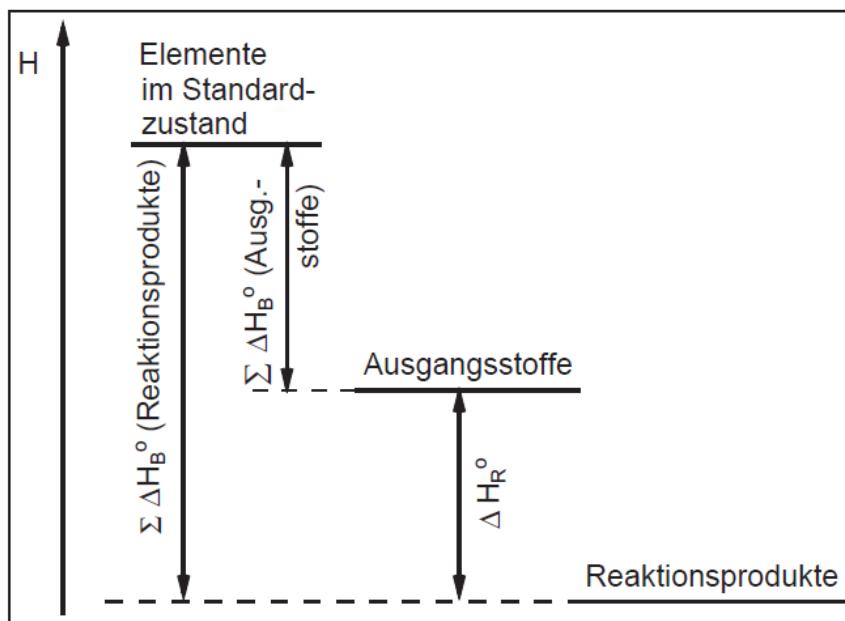


Abbildung 4.2
Enthalpiediagramm
einer exothermen
Reaktion

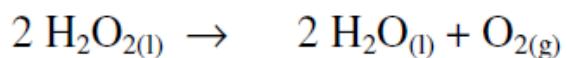
Chemische Grundlagen

Reaktionsenthalpie, Beispiel Wasserstoffperoxid

Übung: Berechnung der Reaktionsenthalpie aus den Bildungsenthalpien

Wie viel Energie wird frei oder verbraucht beim Zerfall von 2 mol $\text{H}_2\text{O}_{2(\text{l})}$ zu 2 mol H_2O und 1 mol O_2 (bei Standardbedingungen)?

Lösungsweg:



$$\begin{aligned}\Delta H_f^0 \text{ H}_2\text{O}: & -285 \text{ kJ/mol} \\ \Delta H_f^0 \text{ O}_2: & 0 \text{ kJ/mol} \\ \Delta H_f^0 \text{ H}_2\text{O}_2: & -191 \text{ kJ/mol}\end{aligned}$$

Wichtig: Bei der Berechnung von Reaktionsenthalpien aus Bildungsenthalpien müssen die stöchiometrischen Faktoren in der Reaktionsgleichung berücksichtigt werden!

$$\Delta H_R^0 = \Sigma \Delta H_f^0(\text{Produkte}) - \Sigma \Delta H_f^0(\text{Edukte})$$

$$\Delta H_R^0 = [2 \cdot (-285 \text{ kJ/mol}) + 1 \cdot 0 \text{ kJ/mol}] - 2 \cdot (-191 \text{ kJ/mol}) = \underline{\underline{-188 \text{ kJ/mol}}}$$

Lösung:

$$\Delta H_R^0 = -188 \text{ kJ/mol}$$

Bei dieser Reaktion wird Energie frei, es handelt sich somit um eine exotherme Reaktion.

Chemische Grundlagen

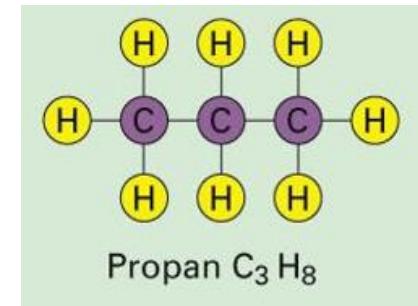
Reaktionsenthalpie, Beispiel Verbrennung Propan

Beispiel 1: Verbrennung von Propan



Es gilt für Standardbed.:

$$\Delta H_r^0 = \sum \Delta H_f^0(\text{Produkte}) - \sum \Delta H_f^0(\text{Edukte})$$



Folgende Standard-Bildungsenthalpien müssen angegeben werden.

$$\Delta H_f^0 (\text{C}_3\text{H}_8) = -104 \text{ kJ/mol}$$

$$\Delta H_f^0 (\text{O}_2) = 0 \text{ kJ/mol}$$

$$\Delta H_f^0 (\text{CO}_2) = -393 \text{ kJ/mol}$$

$$\Delta H_f^0 (\text{H}_2\text{O l}) = -285 \text{ kJ/mol}$$



Rechnung:

$$\Delta H_r^0 = [3\text{mol} \cdot (-393 \text{ kJ/mol}) + 4\text{mol} \cdot (-285 \text{ kJ/mol})] - [1\text{mol} \cdot (-104 \text{ kJ/mol})]$$

$$\Delta H_r^0 = \underline{-2215 \text{ kJ}}$$

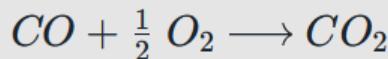
Chemische Grundlagen

Reaktionsenthalpie, Beispiel Verbrennung CO

1/2 Mol Sauerstoff und ein Mol Kohlenstoffmonoxid reagieren zu 1 Mol Kohlenstoffdioxid. **Berechne die Reaktionsenthalpie. Handelt es sich um eine exotherme oder endotherme Reaktion?** Nachschlagen der einzelnen Standardbildungsenthalpien liefert folgende Werte:

$$CO = -111 \frac{\text{kJ}}{\text{mol}} \quad O_2 = 0 \frac{\text{kJ}}{\text{mol}} \quad CO_2 = -393 \frac{\text{kJ}}{\text{mol}}$$

Reaktionsgleichung:



$$\Delta H_R = \Delta H_f^0(\text{Produkte}) - \Delta H_f^0(\text{Edukte})$$

Da man hier explizit die Molmengen kennt, werden diese in der Rechnung berücksichtigt. Man berechnet also hier den absoluten Wert der Reaktionsenthalpie in **Joule**, der für genau die in der Aufgabe beschriebenen Stoffmengen frei wird.

$$\Delta H_R = 1 \text{ mol} \cdot (-393 \frac{\text{kJ}}{\text{mol}}) - [(\frac{1}{2} \text{ mol} \cdot 0 \frac{\text{kJ}}{\text{mol}}) + 1 \text{ mol} \cdot (-111 \frac{\text{kJ}}{\text{mol}})]$$

$$\Delta H_R = -282 \text{ kJ}$$

Da die **Reaktionsenthalpie also negativ** ist, handelt es sich um eine **exotherme Reaktion**.

Chemische Grundlagen

Reaktionen, MWG

Zusammenfassung:

- Im Gleichgewichtszustand gilt das **Massenwirkungsgesetz**, d.h. der Quotient aus Produkten und Edukten ist konstant.
- Die **Zufuhr von Edukten und die Entfernung von Produkten** aus dem System begünstigt die Hinreaktion zu den Produkten.
- Eine **Temperaturerhöhung** begünstigt bei endothermen Reaktionen (Gefäß wird kalt) die Hinreaktion zu den Produkten.
- Eine **Temperaturverringerung** begünstigt bei exothermen Reaktionen (Gefäß wird warm) die Hinreaktion zu den Produkten.
- Eine **Erhöhung des Druckes** verschiebt ein Gleichgewicht, an dem gasförmige Stoffe beteiligt sind, **zu der Seite mit der kleineren Anzahl von Gasteilchen**.

Chemische Grundlagen

Reaktionen, MWG

Zusammenfassung:

- **Katalysatoren** beschleunigen Reaktionen, in dem sie die **Aktivierungsenergie** herabsetzen und sie bleiben durch den Vorgang unverändert!
- Die **Reaktionsenthalpie ΔH_R** ergibt sich aus der Differenz der Summen der **Standardbildungsenthalpien ΔH_B bzw. ΔH_f** der **Produkte** minus der Summen der **Standardbildungsenthalpien ΔH_B bzw. ΔH_f** der **Edukte**.
- Aus diesen Kenngrößen kann abgeleitet, wie „reaktionsfreudig“ die Reaktionspartner sind und ob die Reaktion **exotherm** oder **endotherm** ist.

